



TITLE:

HOPG基板上における分子配列のモデリング

AUTHOR(S):

西谷, 暢彦

CITATION:

西谷, 暢彦. HOPG基板上における分子配列のモデリング. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2016, 2015: 46-46

ISSUE DATE:

2016-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/214370>

RIGHT:

HOPG 基板上における分子配列のモデリング
Model study of molecular ordering on HOPG surface

京都大学 工学研究科 合成・生物化学専攻 西谷 暢彦

研究成果概要

分子を構成単位とするナノデバイスの構築に向けて、固液界面における分子の自己組織化が注目されている。固液界面では溶液を平面基板上に滴下するだけで自発的に分子配列を形成できるという簡便性がある。本研究ではオクタン酸/高配向性熱分解グラファイト (HOPG) 界面における分子配列形成挙動を走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて観察した。

モデル化合物としてアミド基およびウレア基を導入した化合物 **1a–3a**, **1u–3u** を設計・合成した (Figure 1)。それぞれのオクタン酸溶液を調製し、HOPG 基板上における配列形成を STM により観察した。得られた配列像及び配列の格子定数を参考にし、Materials Studio を用いた MM/MD 計算により分子配列モデルを作成した。計算では適度な大きさの HOPG 基板を計算に含め、構造最適化プロセスの中で HOPG 基板の炭素原子の座標を固定する制限を加えた。また、分子間水素結合の影響を考慮することを目的として、力場には DREIDING force field を採用した。

STM 観察の結果、化合物 **1u** および **3a** が特異的な分子配列を形成した (Figure 2)。STM 像において、芳香環部位は明線として観察されるが、**1u** の明線の幅 (約 1.2 nm) は **1a** (約 2.4 nm) と比較して約半分であることが観察された (Figure 2a, 2b)。この配列像をもとに MM/MD 計算により最適構造を探索した結果、**1a** の配列は分子全体が基板に吸着しているのに対し、**1u** の配列はウレア基とフェニル基が溶液中に立ちあがった配列構造を取ることが示唆された。また **3a** に関して、配列中で暗線として観察されるアルキル鎖領域に芳香環の輝点がまばらに存在することが観察された (Figure 2c)。これより **3a** 分子が配列中でアミド基を中心として反転していることが示唆された。さらにこの反転間隔のヒストグラムを作成したところ、配列中で 1 分子の反転が規則的に生じていることが明らかになった。^[1]

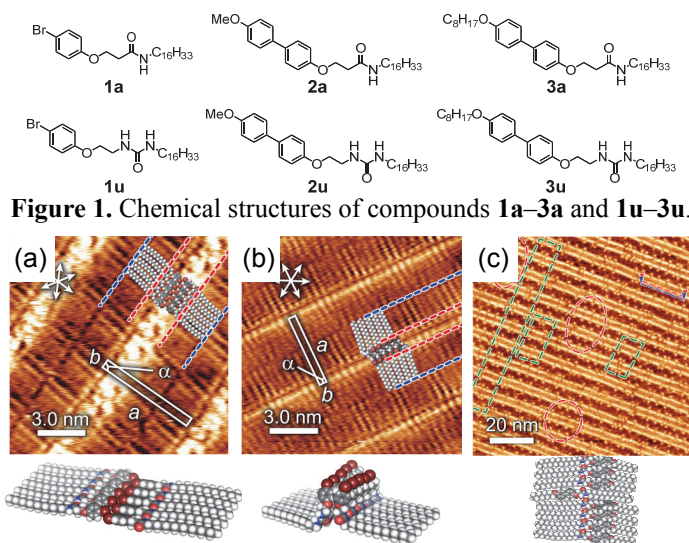


Figure 1. Chemical structures of compounds **1a–3a** and **1u–3u**.

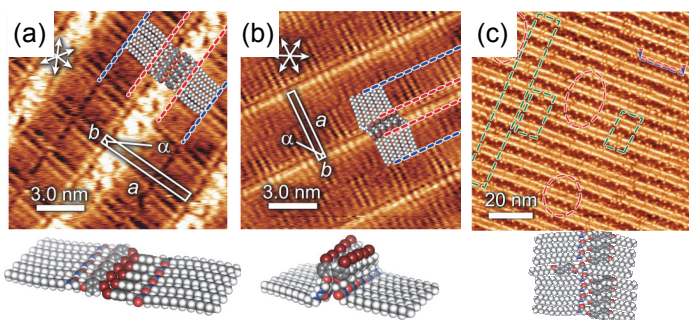


Figure 2. High-resolution STM images and molecular models of the ordering of (a) **1a**, (b) **1u**, and (c) **3a** at the octanoic acid/HOPG interface.

発表論文 (謝辞なし)

[1] N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Chem. Asian J.* **2015**, *10*, 1926–1931.